

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФРАКЦИОННЫХ КАРТИН ДВУХФАЗНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ПРИМЕРЕ $\alpha+\beta$ ТИТАНОВЫХ СПЛАВОВ

¹*Заводов А.В.*

Руководитель – с.н.с., к.т.н. ²Лукина Е.А.

¹МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва,

²ФГУП «Всероссийский институт авиационных материалов» ГНЦ РФ
zavodovav@gmail.com

В работе представлена рабочая версия программы Titanogramm, позволяющей решать задачи автоматического индирования электронограмм титановых $\alpha+\beta$ сплавов. В программе помимо построения дифракционных картин смоделирована геометрия гониометра просвечивающего электронного микроскопа (наклон и поворот), а также возможность автоматического определения оси зоны.

В настоящее время просвечивающая электронная микроскопия является незаменимым методом исследования тонкой структуры материалов. Возможность прямого наблюдения структуры с высоким разрешением является главным отличием просвечивающей электронной микроскопии от других методов исследования.

Расшифровка дифракционных картин является необходимым этапом при исследовании кристаллических материалов, содержащих дополнительные фазы. В процессе расшифровки электронограмм (индирования) могут решаться такие задачи как:

- Определение типа решетки наблюдаемой фазы
- Ориентация выделений относительно матрицы
- Определение относительных межплоскостных расстояний
- Разделение рефлексов от фаз с многими ориентировками

Расшифровка электронограмм ручными методами [1] (см. работу [2]) представляет собой непростую задачу, даже когда в материале присутствует всего две фазы. Электронограмма, представленная на рис. 1 была получена от двухфазной области титанового сплава при минимальном диаметре селективной диафрагмы. Далее будет показано, что здесь реализовано 11 из 12 возможных ориентировок α -пластин относительно исходного β -зерна.

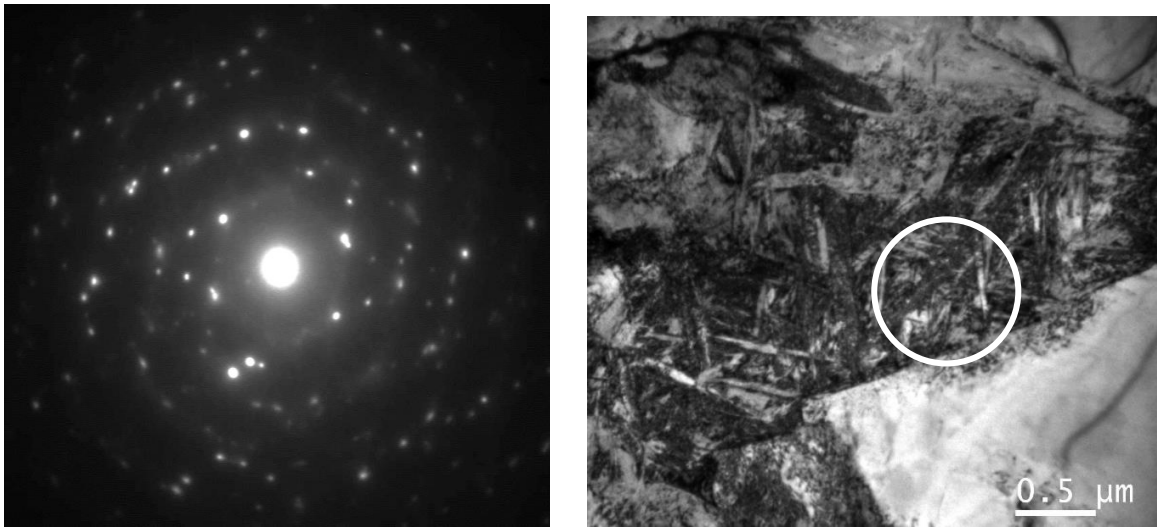


Рисунок 1. а) электронограмма от $\alpha+\beta$ области; б) область, с которой получена дифракция (центральная часть)

Для упрощения работы по расшифровке структуры многофазных материалов была написана программа, рассчитывающая дифракционные картины от двухфазных кристаллических материалов. Исходными данными алгоритма программы являются параметры решеток фазы и матрицы и их ориентационные соотношения. Совмещение решеток осуществлялось путем составления матриц соответствий (МС), которые позволяют определить ось зоны одного кристалла, при заданной оси зоны второго.

$$u_1v_1w_1 = M \cdot u_2v_2w_2, \text{ где}$$

$u_1v_1w_1$, $u_2v_2w_2$ — оси зоны первого и второго кристаллов соответственно,

M — матрица соответствия.

Применимость методик для ручной расшифровки электронограмм ограничена конкретной парой кристаллических решеток и ориентационных соотношений [3]. Поэтому, в данной работе был написан общий алгоритм, позволяющий работать со всеми сингониями кристаллов при любых их взаимных ориентациях. В общем виде алгоритм нахождения взаимно параллельных направлений в двух кристаллах описывается следующим образом:

$$u_1v_1w_1 = M_{он1}^{-1} \cdot M_{ос1} \cdot M_{ос2}^{-1} \cdot M_{он2} \cdot u_2v_2w_2, \text{ где}$$

$u_1v_1w_1$, $u_2v_2w_2$ — параллельные направления первого и второго кристаллов;

$M_{он1}$, $M_{он2}$ — матрицы ортонормирования для первой и второй решетки соответственно;

$M_{ос1}$, $M_{ос2}$ — матрицы разложения ортонормированных векторов $u_1v_1w_1$, $u_2v_2w_2$ по базису ориентационных векторов.

В программе Titanogram реализован частный вариант алгоритма для $\beta \rightarrow \alpha$ превращения в двухфазных титановых сплавах.

В качестве исходных данных были взяты параметры α и β фаз титанового сплава и ориентационные соотношения (ОС) Бюргерса для ОЦК→ГПУ превращения:

$$\{110\}_{\text{ОЦК}} \parallel \{001\}_{\text{ГПУ}} \quad \langle 111 \rangle_{\text{ОЦК}} \parallel \langle 100 \rangle_{\text{ГПУ}}$$

Для построения совмещенных электронограмм алгоритм необходимо повторить для всех вариантов уникальных ориентаций. Для $\beta \rightarrow \alpha$ превращения количество таких ориентаций равно 12.

В программе доступны следующие функции:

- отображение электронограмм от каждой фазы по отдельности и в сочетании
- отображение электронограмм от нескольких ориентаций α -фазы сразу
- возможность отобразить/скрыть индексы рефлексов
- изменение/ограничение масштаба электронограммы;

А также функции, позволяющие работать с программой непосредственно во время эксперимента:

- плавный поворот электронограммы до совмещения с экспериментальной;
- изменение положения оси наклона держателя (которая зависит от конструктивных особенностей прибора и длины камеры);
- наклон и вращение модели решеток, соответствующие геометрии микроскопа с одним наклоном и поворотом образца в плоскости фольги (без учета эксцентриситета);
- автоматическое определение оси зоны (по трем рефлексам)

Ниже представлено рабочее окно программы с построенной электронограммой $[110]_{\beta} + 1$ ориентация α $[001]$:

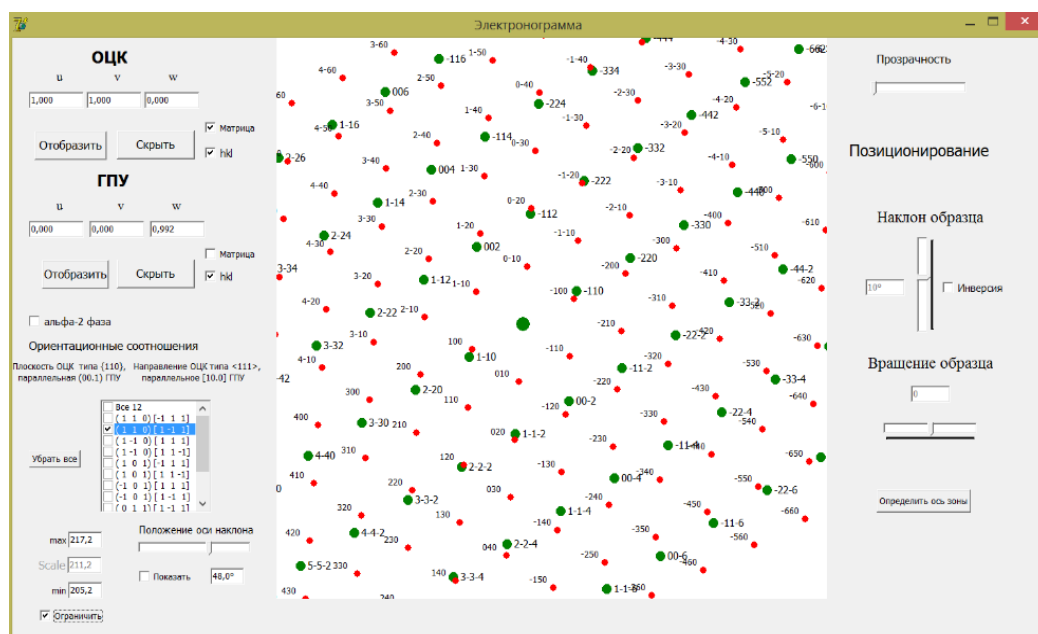


Рисунок 2. Рабочее окно программы

Корректность работы программы подтверждена экспериментально. На рис. 3 показаны наложения электронограмм, полученных моделированием в программе Titanogramm, на экспериментальные.

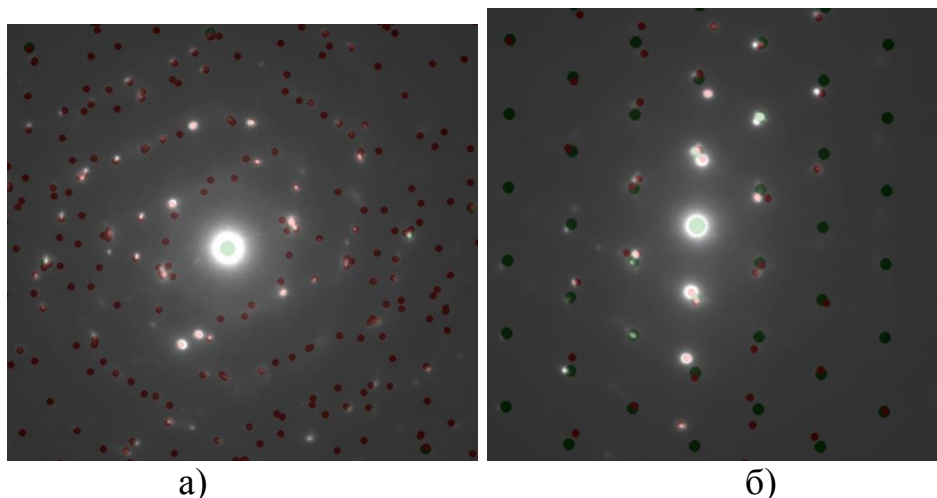


Рисунок 3. а) – ось зоны рядом с $[122]_{\beta} + 11$ ориентаций α -пластин;
б) ось зоны $[111]_{\beta} + 2$ ориентации α -пластин

Работа с программой во время эксперимента позволяет быстро решать такие практические задачи, как нахождение рефлексов β -фазы среди множества α -рефлексов; разделение рефлексов ГПУ фазы от разных ориентационных соотношений; поиск рефлексов, не относящихся к α и β фазам; оценка «ухода» оси зоны из-за вращения образца при ненулевом наклоне гониометра.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ:

1. МР 47-36 / СМИ-72. Методическая рекомендация. Прямое электронно-микроскопическое исследование двухфазных титановых сплавов (Приготовление объектов и индентирование электронограмм) / М.:ВИЛС. 1972. 48 с.
2. А.А. Попов, А.Г. Илларионов, И.В. Нарыгина. Отчет о научно-исследовательской работе «Разработка способов повышения эксплуатационных свойств жаропрочных $(\alpha+\beta)$ -титановых сплавов авиационного назначения путем варьирования режимов термической обработки». / ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»
3. Ноткин А.Б., Утевский Л.М., Терентьева П.В., Усиков М.П., Анализ составных электронограмм от ОЦК и ГПУ фаз. Заводская лаборатория, т.8, 1973.
4. Титановые сплавы. Металлография титановых сплавов/ Е. А. Борисова, [и др.]. М.: «Металлургия». 1980. 464 с.